



TITLE:

s-d相互作用による基底状態のエネルギー

AUTHOR(S):

近藤, 淳

CITATION:

近藤, 淳. s-d相互作用による基底状態のエネルギー. 物性研究 1966, 6(5): 196-200

ISSUE DATE:

1966-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85908>

RIGHT:

s-d 相互作用による基底状態のエネルギー

近 藤 淳^{*} (電試)

(7月20日受理)

金属中に常磁性不純物を一コ入れた場合の基底状態のエネルギーは、 J が小さいときすでに議論したように次のように表わされると推定される。¹⁾

$$E = -k_1 J^2 \rho^2 D - k_2 D \exp(-1/k_3 |J| \rho) + \dots \quad (1)$$

ここに k は 1 の程度の常数、 ρ は一原子当りの状態密度、 $2D$ はバンドの中で ρ は一定とし、フェルミ・エネルギーはバンドの中央とする。第一項は伝導電子の散乱からくる通常の摂動の最初の項であり、第二項は束縛状態による下りとみなされる。すでに J が負の場合は $k_3 = 2$ であろうと推定したが、¹⁾ この論文ではたしかに $k_3 = 2$ であることを示しかつ k_1 の値も定める。

そのために次のように考える。通常の散乱項は(1)の第一項と、そのほか J^3 , $J^4 \dots$ に比例する項があるが、それらには $J\rho$ が小さい限り摂動展開が適用出来るとする。しかしこのことは直ちに E が J で展開出来ることを意味するのではなく E からある値 (1)の第二項) を引いた残りに摂動論を適用すべきであると考え。そのために Rayleigh-Schrödinger と Brillouin-Wigner の中間のような方式を用いることにする。

波動函数を次のように展開する。

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 + \phi_2 + \dots \quad (2)$$

ここで ϕ_0 は無摂動の基底状態で、伝導電子がフェルミ球をみだし局在スピンの $S_z = S$ であるような状態、 ϕ_1 はこれから electron-hole pair を一つ作った状態、 ϕ_2 は二コ作った状態とする。これを $(H_0 + V)\phi = E\phi$ にいれて両辺の

^{*}) 現在ベル電話研究所に在職中。

pair の数の等しい部分をくらべると

$$H_0 \phi_0 + {}^0(V\phi_1) = E \phi_0 \quad (3)$$

$$H_0 \phi_1 + V\phi_0 + {}^1(V\phi_1) + {}^1(V\phi_2) = E \phi_1 \quad (4)$$

等がえられる。ここで、例えば ${}^1(V\phi_2)$ は $V\phi_2$ のうちの electron-hole pair が一コの部分を表わす。

これらの式を $\phi_1, \phi_2 \dots$ について摂動でとく。そのために

$$\phi_1 = \phi_1^{(1)} + \phi_1^{(2)} + \dots$$

$$\phi_2 = \phi_2^{(2)} + \phi_2^{(3)} + \dots$$

と展開する。ここで $\phi_1^{(j)}$ は ϕ_1 の j 次の部分。また E は

$$E = E_0 + E_2 + E_3 + \dots \quad (5)$$

と展開する。 $E_2, E_3 \dots$ は J について 2, 3... 次とする。 E_0 はすでにのべたように無摂動のエネルギー $\langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle$ と必ずしも等しくない。これらを (4) に代入すると

$$\phi_1^{(1)} = (E_0 - H_0)^{-1} V \phi_0$$

$$\phi_1^{(2)} = (E_0 - H_0)^{-1} {}^1(V (E_0 - H_0)^{-1} V \phi_0)$$

等をうる。これを (3) に代入すれば

$$E = E_0 + E_2 + E_3 + \dots$$

$$= \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle + \langle \phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} V \phi_0 \rangle$$

$$+ \langle \phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} V (E_0 - H_0)^{-1} V \phi_0 \rangle$$

$$+ \langle \phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-1} V (E_0 - H_0)^{-1} V (E_0 - H_0)^{-1} V \phi_0 \rangle$$

$$- E_2 \langle \phi_0 | V (E_0 - H_0)^{-2} V \phi_0 \rangle + \dots$$

近藤 淳

をうる。これは E_0 を self-consistent に定める式である。明らかに $E_0 = \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle$ という解が存在する。この場合(6)は Rayleigh-Schrödinger の摂動論と一致する。しかし J が負の場合にはこれよりエネルギーの低い解があることを示そう。

そのため(6)のマトリクス・エレメントを計算する。

そうすると n 次の項には $a \{\log(a/D)\}^r$ ($0 \leq r \leq n-1$) に比例した項が含まれることが判る。ここに $a \equiv \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle - E_0$ 。我々は最も強く発散する項 ($r=n-1$) のみとることにする。

すると

$$E = E_0 + E_2 + E_3 + \dots$$

$$= \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle - 4 \log 2 \cdot s(s+1) J^2 \rho^2 D + O(J^3 \rho^3)$$

$$- 2J^2 \rho^2 s(s+1) a \log(a/D) \{ 1 + 2J \rho \log(a/D)$$

$$+ (2J \rho \log(a/D))^2 + \dots \} \quad (7)$$

がえられる。ここで第2、3項は J の2、3次であつて E_2, E_3 はこれに等しいとおく。対等の級数は幾何級数と推定されるから結局 $E_0 - \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle = -a$ から

$$a = 2J^2 \rho^2 s(s+1) a \log(a/D) \{ 1 - 2J \rho \log(a/D) \}^{-1} \quad (8)$$

がえられる。これから、すでにのべたように $a=0$ という解があることが判る。 J が正のときはこれが唯一の解であつて

$$E = \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle - 4 \log 2 \cdot s(s+1) J^2 \rho^2 D + O(J^3 \rho^3) \quad (9)$$

となつて Rayleigh-Schrödinger と一致する。しかし J が負のときは

$$1 - 2J \rho \log(a/D) = 2J^2 \rho^2 s(s+1) \log(a/D) \quad (10)$$

が解をもつ。最も強く発散する項のみ残すという我々の近似と consistent

であるためにはこれを

$$1 - 2J\rho \log(a/D) = 0(J\rho) \quad (11)$$

とすべきであり、これから

$$a = k_2 D \exp(1/2J\rho) \quad (J < 0) \quad (12)$$

となる。 k_2 は 1 の程度の量。これから E は

$$E = \langle \phi_0 | H_0 | \phi_0 \rangle - 4 \log 2 \cdot s(s+1) J^2 \rho^2 D + O(J^3 \rho^3) \\ - k_2 D \exp(1/2J\rho) \quad (J < 0) \quad (13)$$

となる。これは $J\rho$ が 1 よりも小さい極限で正しい。これは Rayleigh-Schrödinger 摂動にくらべて最後の項だけ低い。

我々の基底状態は $(2s+1)$ 重に縮退している。しかしこれは必ずしもスピンの生きのこっていることを意味しない。

この点をしらべるために我々の波動関数(2)で S_z の平均を計算しよう。すると

$$\langle S_z \rangle - S = 2J^2 \rho^2 s \log(a/D) \{ 1 + 2J\rho \log(a/D) \\ + (2J\rho \log(a/D))^2 + \dots \} \\ = 2J^2 \rho^2 s \log(a/D) \{ 1 - 2J\rho \log(a/D) \}^{-1} \quad (14)$$

がえられる。ここで再び最も強く発散する項のみ残した。不幸にして (11) から判るように 我々の最も強く発散する項のみ残すという近似では (14) の値を正確に定めることは出来ない。しかし S_z の変化が 1 の程度であることは判る。すなわち、例えば $S = \frac{1}{2}$ の場合をとると、 ϕ_0 ではスピンは例えば上向であつたのが、相互作用によつて下向きの状態も 1 の程度混ざることになる。

(或いは逆に、これが 1 の程度であるという要請をおくと (14) から $1 - 2J\rho \log(a/D)$ が $J\rho$ の程度でなければならず、従つて $k_2 = 2$ がえられるといつてよい。) 上向きと下向きとが正確に同じだけ混っているかどうかは判らなかつた

近藤 淳

が、我々はそうであろうと推定する。そうすると我々の基底状態のもつスピンの2重縮退は伝導電子のスピンの向きから生じていることになりこれは(不純物が有限の fraction あれば) トリビアルといえる。

文 献

- 1) 近藤 淳、物性研究 (1966年) 6月号